

2010 年度 修士論文要旨

## Designing band structures of graphene by hydrogen termination

関西学院大学大学院理工学研究科  
情報科学専攻 早藤研究室 久保 佑介

### [背景]

現在、半導体 ULSI 素子の製造において、様々な金属材料が利用されている。希少金属の価格急騰や再資源化を巡る問題が起こっている。さらに、目まぐるしい微細化技術の発展の一方で、Si ULSI が微細化限界を迎えつつあるという現状がある。微細化を妨げる物理的な要因としては、微細であるが故に無視する事ができなくなる原子の揺らぎや、リーク電流による発熱のような問題が挙げられる。本論文では、そのような深刻な問題を解決すべく、多様なナノカーボン材料の中でも、世界中の研究機関で精力的に研究されており、特異な物性を持つ「グラフェン」に注目した。

### [目的]

グラフェンのバンドギャップを制御する方法は複数存在する。我々は水素化によってグラフェンを生成する方法に注目した。グラフェンのアニールされることによって純粋なグラフェンの構造に戻るという特徴を利用し、もしグラフェン、グラフェンの $\pi$ 電子のエネルギー準位と $\pi$ 電子の幾何学的な位置に関係性が存在すれば、 $\pi$ 電子の幾何学的な位置を変化させることによってバンド構造を自由に制御できると考えた。本研究の目的は、グラフェン、グラフェンの $\pi$ 電子のエネルギー準位とその幾何学的な位置との関係性を検討し、 $\pi$ 電子の幾何学的な位置の組み合わせを変化させることによってバンド構造を制御する方法を新たに提案することである。

### [結果]

結果として、グラフェンの $\pi$ 電子準位はクラスターの端に近くなるにつれて低くなることがわかった。さらにその関係はクラスターサイズの大小に依存しないことがわかった。さらに、グラフェンの電子状態は、クラスターの端状態に大きく依存していることが明らかになった。また、グラフェンの $\pi$ 電子準位は端、中心付近共にほぼ同じエネルギー準位を持つことがわかった。しかし、その中でもエネルギー準位に僅かながら差が存在し、その変化の幅は 0.7eV 程度であることがわかった。また、計算によって得られた $\pi$ 電子準位の情報を基に、グラフェンを半導体材料として利用するために必要とされるバンド構造を自在に設計できる可能性について検討を行った。その結果、クラスターサイズ、 $\pi$ 電子の数や位置の組み合わせによってバンドギャップ内の準位を制御することができる可能性を見出すことができた。